
AutormaUserManual

发行版本 **v2.0.0**

www.autorma-sw.com

2025 年 04 月 21 日

1	简介	1
1.1	开发背景	1
1.2	软件介绍	1
1.3	历史版本	1
2	使用背景	3
2.1	ReaxFF 模拟产物简介	3
2.2	分析文件简介	3
3	安装指南	7
3.1	下载	7
3.2	安装	7
3.3	激活注册	7
4	软件界面	11
4.1	标题栏	11
4.2	菜单栏	12
4.3	工具栏	12
4.4	中心部件	12
4.5	状态栏	13
5	快速开始	15
5.1	生成 param.qeq 文件	15
5.2	生成 data 文件	15
5.3	分析 species 文件	17
5.4	打开已有项目	21

1.1 开发背景

反应分子动力学 (ReaxFF MD) 是一种从分子尺度对具有化学反应的复杂系统进行机理研究的一种有效方法, 其允许在分子系统中基于势函数描述化学键的形成、过渡和离解。在反应分子动力学上取得的进展为研究原子尺度上非常复杂的化学反应过程中的反应机制提供了一种很有前途的方法。然而, 在分析具有复杂化学反应的大分子系统模拟结果时出现了挑战, 反应分子动力学模拟可以获得基于时间步的原子坐标、键序信息以及分子式等信息。反应分子动力学可应用于大规模 (大于 10000 个原子) 的系统, 面对这种 (超) 大规模的模拟系统时, 人工分析机理耗费大量的时间和精力并且不现实。因此 AutoRMA 应用而生, 旨在为研究人员提供一种十分便捷和易用、甚至可定制的反应分子动力学模拟结果的分析与可视化的可选方式。

1.2 软件介绍

AutoRMA (Automatic Reaction Mechanism Analyzer) 全称为全自动 ReaxFF 反应机理分析软件。

AutoRMA 主要分为 AutoRMA-Full (简称 AutoRMA) 和 AutoRMA-Lite 版本, 其中 AutoRMA-Full 具有 Lammmps-ReaxFF 物种 (分子) 文件分析及键序和轨迹分析能力, 而 AutoRMA-Lite 是 AutoRMA-Full 的子集, 主要服务于物种 (分子) 文件的分析。以下统称为 AutoRMA, 非必要不做特别区分。

1.3 历史版本

表 1: AutoRMA-Lite 版本记录

版本号	发布日期	支持平台	更新信息
2.0.0	2025.03.27	Windows	发布
2.0.1	2025.04.10	Windows	支持物种文件为合并原子分析
2.0.2	2025.04.13	Windows	修复通过元素周期表添加原子卡死问题

表 2: AutoRMA-Full 版本记录

版本号	发布日期	支持平台	更新信息
2.0.0	待发布	Windows	待发布

2.1 ReaxFF 模拟产物简介

基于 LAMMPS 的 ReaxFF(分子动力学) 模拟的输入需要文件通常包括力场文件及系统所含原子的力场参数文件 (以下简称参数文件) 和原子坐标文件 (以下简称坐标文件) 等相关文件。ReaxFF 模拟可以生成包含所有原子键级的键序文件, 每个原子坐标的轨迹文件和包含分子信息的分子文件, 此三个文件是获取模拟结果的主要文件。本文档以下均采用 PE 热解的 ReaxFF 模拟数据, 且为显示清晰, 文件只截取部分作为展示内容, 但 AutoRMA 不局限于 PE 热解的动力学模拟结果分析, 其可应用于所有的 ReaxFF 模拟结果分析和输入数据的生成。

2.2 分析文件简介

AutoRMA-Lite 基于分子文件进行分析, 在 LAMMPS 中可以通过以下命令导出。可访问 [fix reaxff/species](#) 以了解更多信息。

```
# Syntax
fix ID group-ID reaxff/species Nevery Nrepeat Nfreq filename keyword value ...
# Examples:
fix 1 all reax/c/species 1 1 100 species.out
```

其格式如下:

AutoRMA 基于键序文件和轨迹文件, 轨迹文件可选, 如果需要三维可视化功能, 则必须提供。

键序文件在 LAMMPS 中可以通过以下命令导出。可访问 [fix reaxff/bonds](#) 以了解更多信息。

```
# Syntax
fix ID group-ID reaxff/bonds Nevery filename
# Examples:
fix 1 all reax/c/bonds 100 bonds.reaxc
```

其格式如下:

轨迹文件在 LAMMPS 中可以通过以下命令导出。可访问 [fix dump/lammpstrj](#) 以了解更多信息。

图 1: 图 2.1: 分子文件快照

```

1 | # Timestep 3000
2 | #
3 | # Number of particles 1804
4 | #
5 | # Max number of bonds per atom 4 with coarse bond order cutoff 0.300
6 | # Particle connection table and bond orders
7 | # id type nb id_1...id_nb mol bo_1...bo_nb abo nlp q
8 | 1154 2 1 1151 0 0.974 0.981 0.000 0.065
9 | 861 1 4 860 865 864 866 0 0.803 0.892 0.921 1.046 3.663 0.000 -0.090
10 | 1553 1 4 1552 1556 1557 1558 0 0.837 0.932 0.955 0.979 3.708 0.000 -0.086
11 | 1552 1 4 1553 1555 1547 1554 0 0.837 0.965 0.874 0.977 3.654 0.000 -0.124
12 | 1555 2 1 1552 0 0.965 0.984 0.000 0.056
13 | 853 2 1 849 0 0.954 0.961 0.000 0.047
14 | 1556 2 1 1553 0 0.932 0.938 0.000 0.025
15 | 1557 2 1 1553 0 0.955 0.958 0.000 0.039
16 | 1561 2 1 1558 0 0.884 0.890 0.000 0.016
17 | 1560 2 1 1558 0 0.957 0.964 0.000 0.056
18 | 1146 2 1 1144 0 0.941 0.941 0.000 0.053
19 | 1558 1 4 1553 1561 1560 1559 0 0.979 0.884 0.957 0.932 3.752 0.000 -0.079
20 | 864 2 1 861 0 0.921 0.925 0.000 0.067
21 | 1566 2 1 1564 0 0.945 0.957 0.000 0.042
22 | 855 1 4 860 854 859 858 0 1.046 0.955 0.941 0.942 3.884 0.000 -0.079
23 | 1550 2 1 1547 0 0.936 0.936 0.000 0.068
24 | 1542 2 1 1540 0 0.933 0.938 0.000 0.029
25 | 1130 2 1 1127 0 0.948 0.966 0.000 0.040
26 | 1562 2 1 1559 0 0.914 0.916 0.000 0.044
27 | 859 2 1 855 0 0.941 0.941 0.000 0.050
28 | 866 1 4 861 868 869 867 0 1.046 0.920 0.895 1.001 3.866 0.000 -0.077
29 | 868 2 1 866 0 0.920 0.921 0.000 0.051
30 | 869 2 1 866 0 0.895 0.896 0.000 0.031
31 | 1563 2 1 1559 0 0.971 0.973 0.000 0.063
32 | 1153 2 1 1150 0 0.964 0.967 0.000 0.061

```

图 2: 图 2.2: 键序文件快照


```
# Syntax
dump ID group-ID style N file attribute1 attribute2 ...
# Examples:
dump 1 all custom 100 pe.lampstrj id xu yu zu
```

其格式如下:

```
1 ITEM: TIMESTEP
2 3000
3 ITEM: NUMBER OF ATOMS
4 1804
5 ITEM: BOX BOUNDS pp pp pp
6 -9.4255591800000005e-01 2.3148644082000001e+01
7 -3.2500044219999999e+00 2.0841195578000001e+01
8 2.6559692299999998e-01 2.4356796923000001e+01
9 ITEM: ATOMS id xu yu zu
10 1154 23.9296 -0.703913 3.06019
11 861 4.67252 -3.23007 3.70609
12 1553 1.59445 0.73621 27.5419
13 1552 1.75732 2.33963 3.74946
14 1555 2.01929 2.37656 4.78081
15 853 0.14295 -2.86947 4.76562
16 1556 0.709143 0.110315 28.0005
17 1557 2.38856 0.163741 28.0612
18 1561 0.858974 -0.741032 26.1289
19 1560 0.640706 0.963892 26.0226
20 1146 23.9808 1.98144 4.75033
21 1558 1.54212 0.335117 26.0284
22 864 3.71024 21.1505 3.0416
23 1566 3.14526 1.92751 24.5357
24 855 3.21451 -2.68529 5.88861
25 1550 3.53304 1.87065 2.47816
26 1542 4.7609 2.28136 5.96712
27 1130 2.34545 1.26484 5.63912
28 1562 2.55889 -1.20058 24.8411
29 859 2.73231 -1.81775 5.30285
30 866 5.05543 -1.77214 3.39837
31 868 4.86482 -1.13986 4.40778
32 869 4.99397 -1.52102 2.1662
```

图 3: 图 2.3: 轨迹文件快照

3.1 下载

从 AutoRMA 官方网站下载安装包, 参考以下链接。

AutoRMA 官网下载入口: <https://www.autorma-sw.com/#section-download>

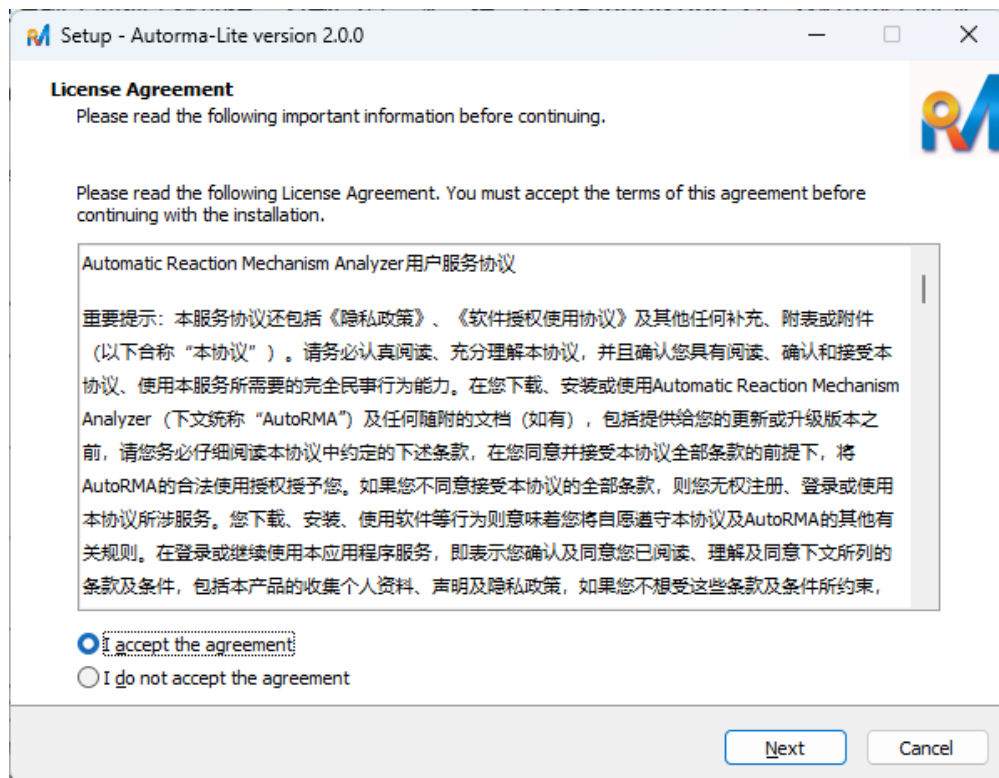
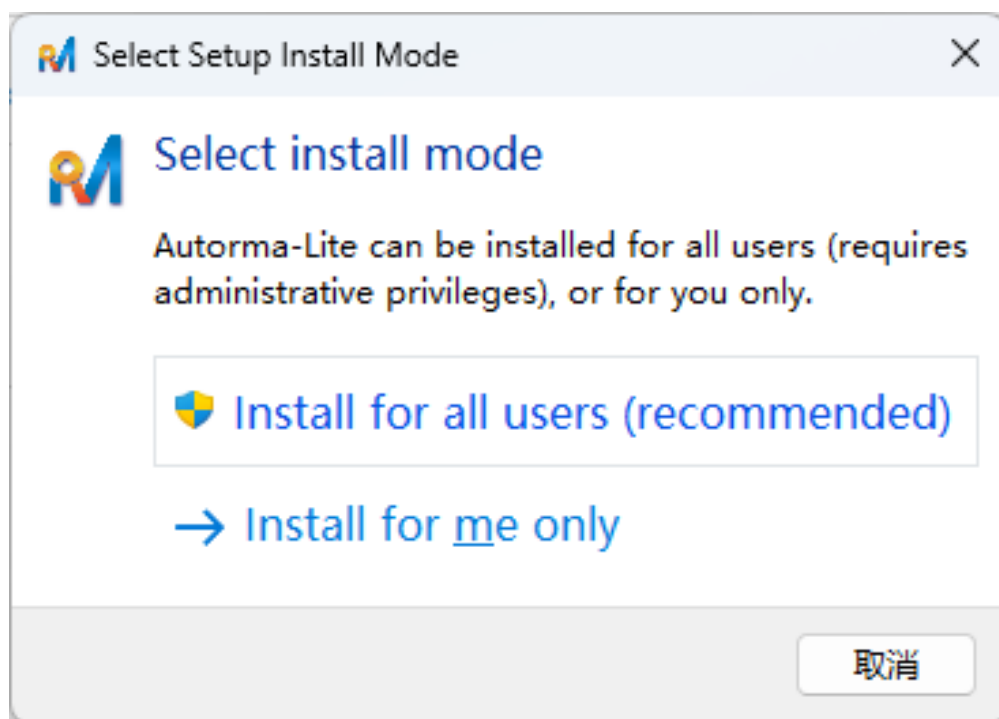
AutoRMA 最新版下载链接: <https://www.autorma-sw.com/downloads/autorma-lite/AutormaLiteSetup-windows-x64-latest.exe>

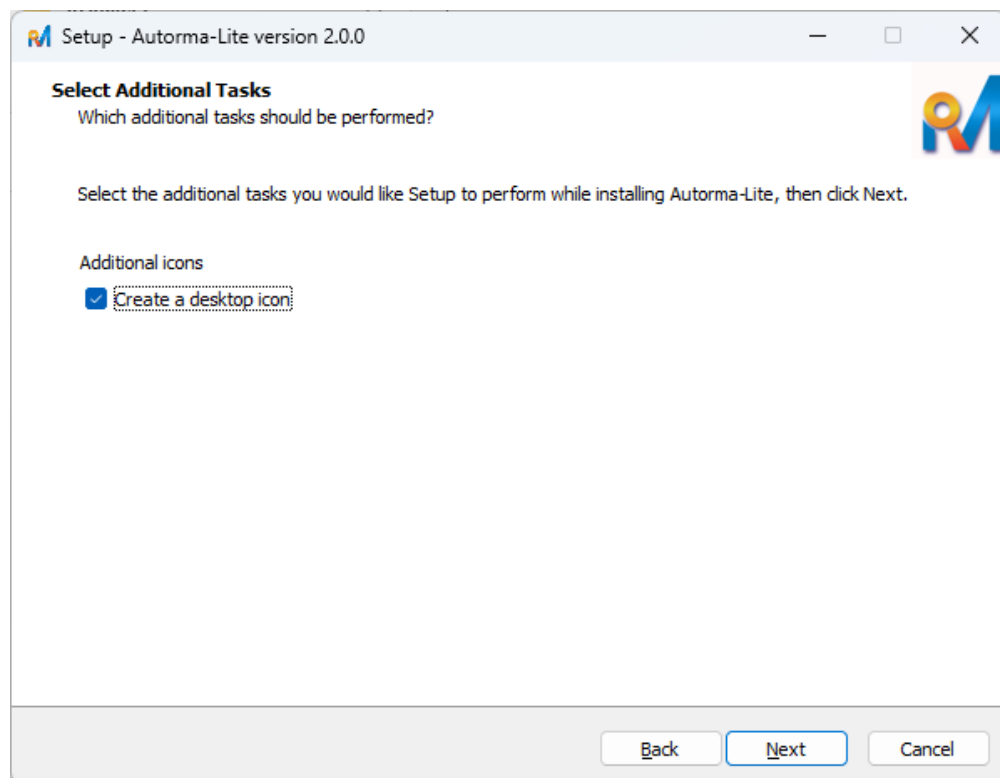
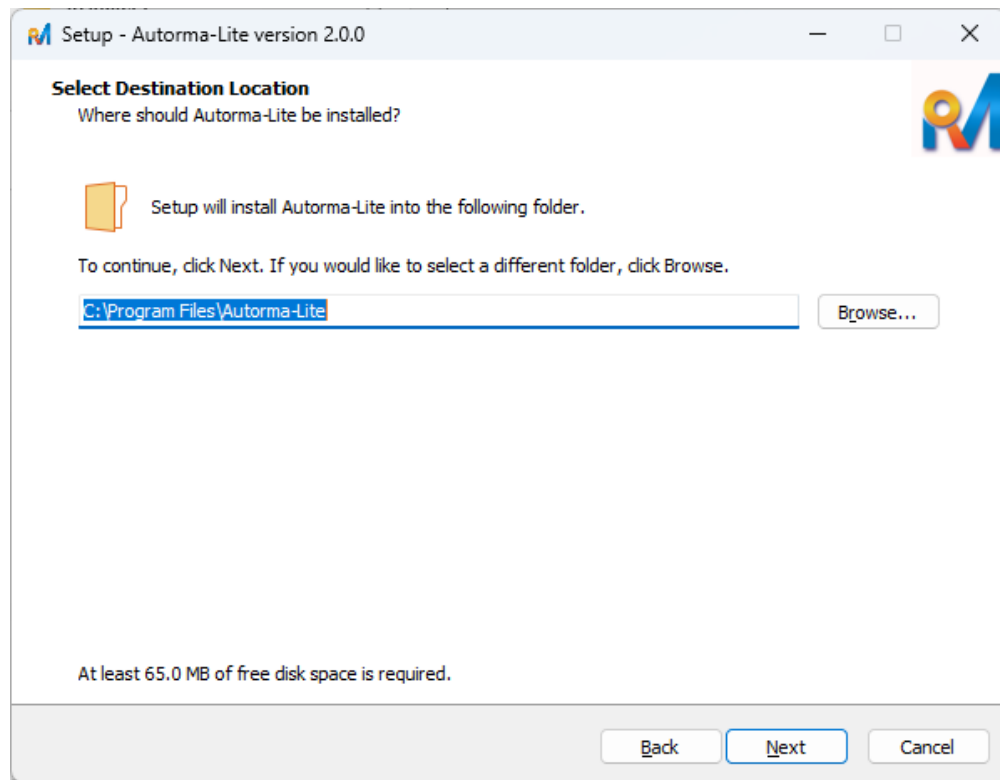
3.2 安装

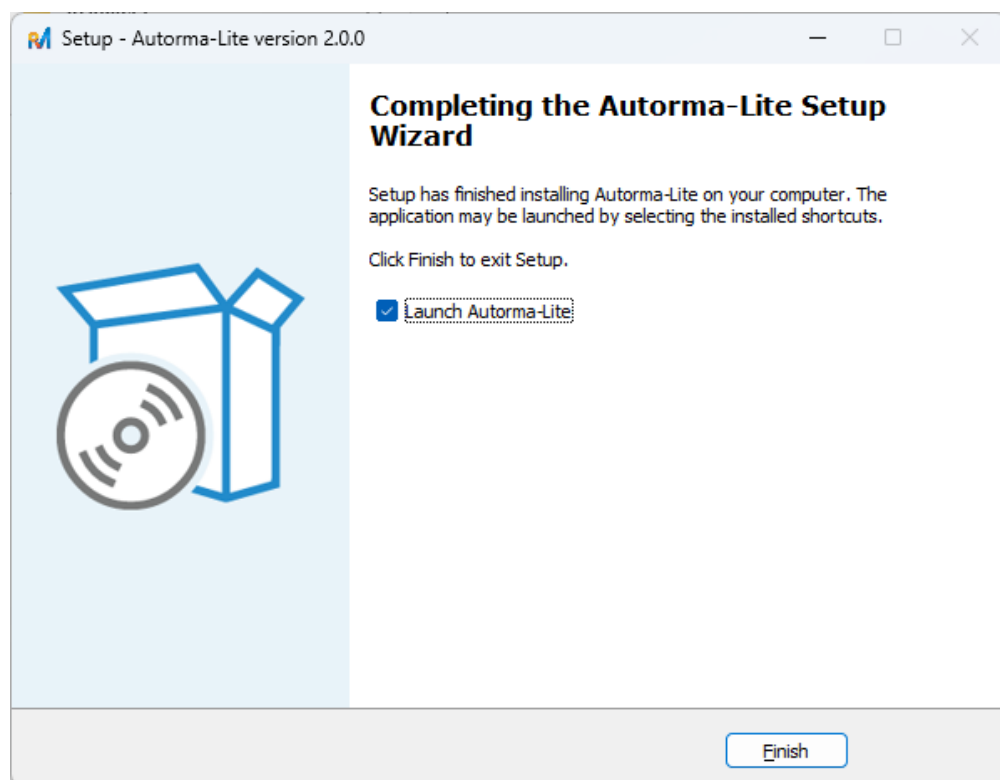
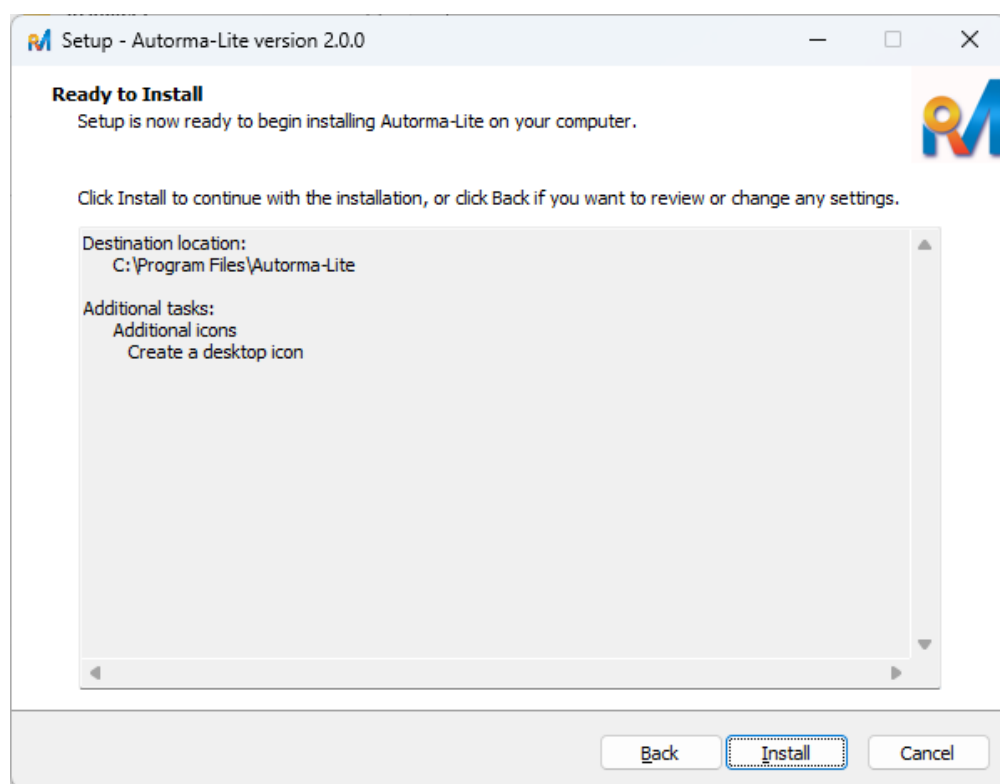
1. 双击安装包开始安装, 选择安装模式。
2. 勾选同意用户协议。
3. 选择安装路径。
4. 创建桌面快捷方式。
5. 安装信息确认。
6. 安装完成。

3.3 激活注册

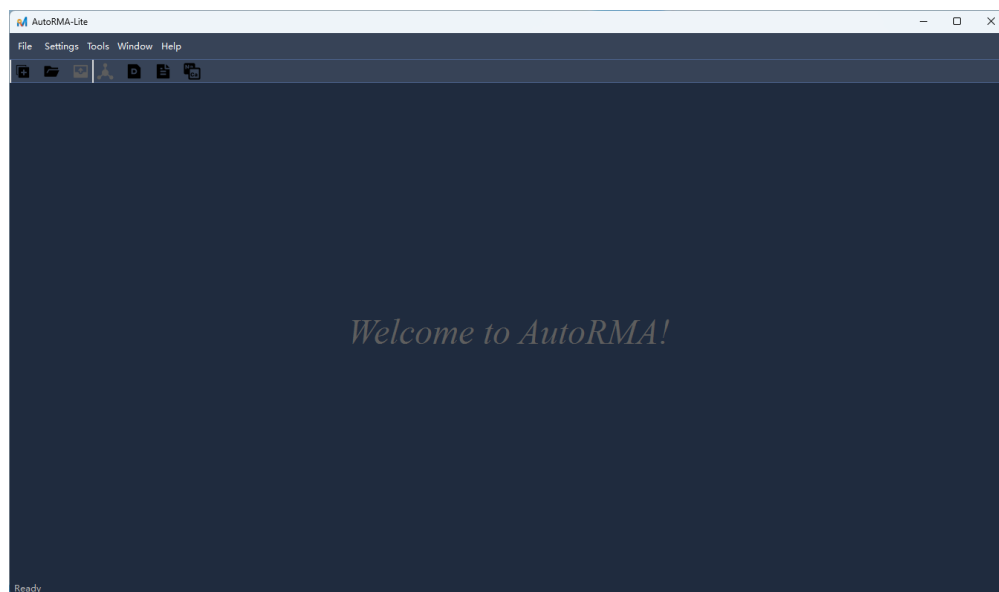
软件安装完成后需激活才可进行使用。激活流程可参考官网激活说明: <https://www.autorma-sw.com/#section-buy>







AutoRMA 主界面如图 3.1 所示, 由标题栏、菜单栏、工具栏、中心部件和状态栏构成。菜单栏主要包括 File、Tools、Settings、Window 和 Help 选项, 各项主要信息如下。



4.1 标题栏

标题栏位于窗口顶部, 显示软件的标题和当前活动的工程名称。

4.2 菜单栏

菜单栏位于标题栏下方, 提供了对软件功能的访问。主要菜单项包括:

1. File
 - New: 新建工程
 - Open: 打开工程
 - Close: 关闭当前工程
 - Export: 导出当前主窗口的表格、曲线图等保存为文件
 - Exit: 退出软件
2. Settings
 - Open After Export: 导出文件之后是否打开
 - Dump Readable Results: 导出可读的分析结果 (分子数量、质量、化学反应数量、化学键和官能团等), 默认为 csv 的格式
3. Tools
 - Visualization Trajectory: 可视化模拟轨迹
 - Generate Data File: 基于 MS 导出的 car 和 md5 文件, 生成 Lammmps 模拟所需的 data 文件
 - Extract Force Field Data: 提取力场参数, 生成 Lammmps 模拟所需的力场 params 文件
4. Windows
 - Style: 提供 Native(不推荐)、Light、Orange 和 Dark 界面风格可选择
5. Help
 - Team: 团队信息简介
 - About: 帮助文档和软件支持信息简介
 - Update: 软件版本检查及更新

4.3 工具栏

工具栏位于菜单栏下方, 提供了快速访问常用功能的按钮, 这些按钮与菜单栏中的命令相对应, 方便用户快速操作, 此处不再赘述。

4.4 中心部件

中心部件是主要工作区域, 主要用于工程的分析结果展示, 主要子窗口包括:

- 目录树: 当前工程的目录结构, 位于左上
- 系统信息表: 当前工程的原子、Timesteps 等信息, 位于左下
- 详细信息: 和目录树相对应, 显示当前选中项的具体信息, 主要为表格、2D/3D 图等
- 进度表: 当前操作的进度的详细信息

4.5 状态栏

状态栏位于窗口底部，显示当前操作的状态等信息。

5.1 生成 param.qeq 文件

在 LAMMPS 进行 ReaxFF 模拟过程中, 需要对原子电荷进行动态调整, 以保持系统的电荷平衡。此过程可以采用以下命令通过 QEQ 方法来确保电荷守恒, 可访问 [fix](#) 以了解更多信息。

```
fix 1 all qeq/reax 1 0.0 10.0 1e-6 param.qeq
```

该命令中 `param.qeq` 为包含 QEQ 计算所需参数的文本文件, 可以从力场文件中提取, AutoRMA 提供了该功能。以下简单操作演示以供快速上手。

1. 点击菜单栏 *Tools->Extract ParamQeq File* 菜单或工具栏 *Extract ParamQeq File* 按钮打开操作面板, 填写 (选择) 力场文件和生成文件路径后点击 *Extract* 按钮。请务必注意, 此处力场文件的类型目前只支持纯文本格式, 如 PDF、Word 等富文本均不支持。
2. 生成的 ParamQEQ 参数如下所示, 需要注意的是, 在提供给 LAMMPS 使用时, 只保留所需的元素行并删除以 # 开始的注释内容。

5.2 生成 data 文件

在 LAMMPS 进行 ReaxFF 模拟时, 可通过 `read_data` 命令读取包含原子或分子系统初始配置的文件, 从而简化纷繁复杂的建模过程。可访问 [read_data](#) 以了解更多信息。

```
read_data pe.data
```

该命令中 `pe.data` 为符合一定规则的原子配置文件。可选的一种方式:

1. 使用 [Material Studio](#) (以下简称 MS) 进行建模, 导出 `car/mdf` 文件, 可参考 [利用 MS 为 LAMMPS ReaxFF 建模 \(PE/聚乙烯\) 基础-2](#);
2. 利用 LAMMPS 包提供的 `msi2lmp` 工具进行转换。

为方便操作以及可定制化 `data` 文件数据内容, AutoRMA 也提供了将 MS 导出的 `car/mdf` 文件转化为 `data` 文件的功能。以下简单操作演示以供快速上手。

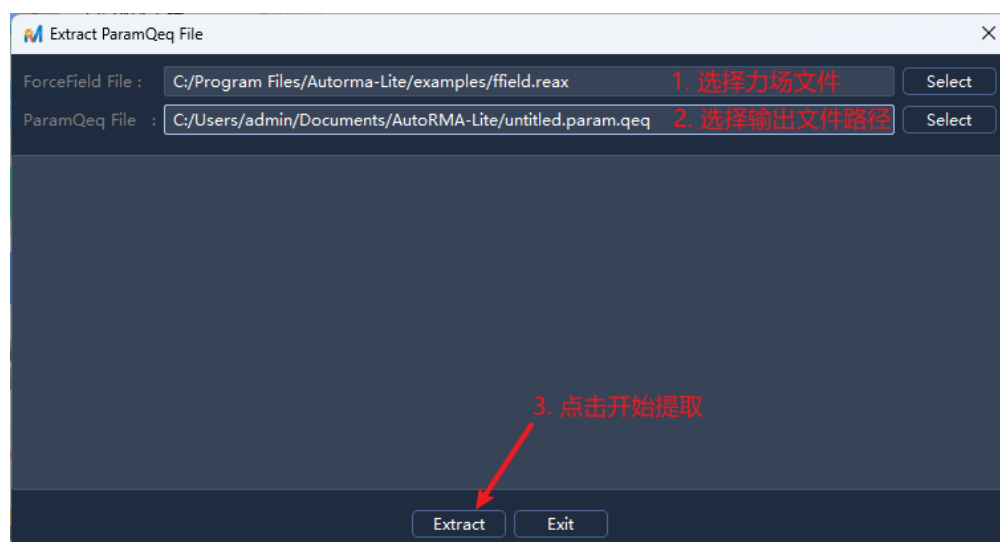


图 1: 图 4.1.1: 提取 ParamQEQ 信息填写

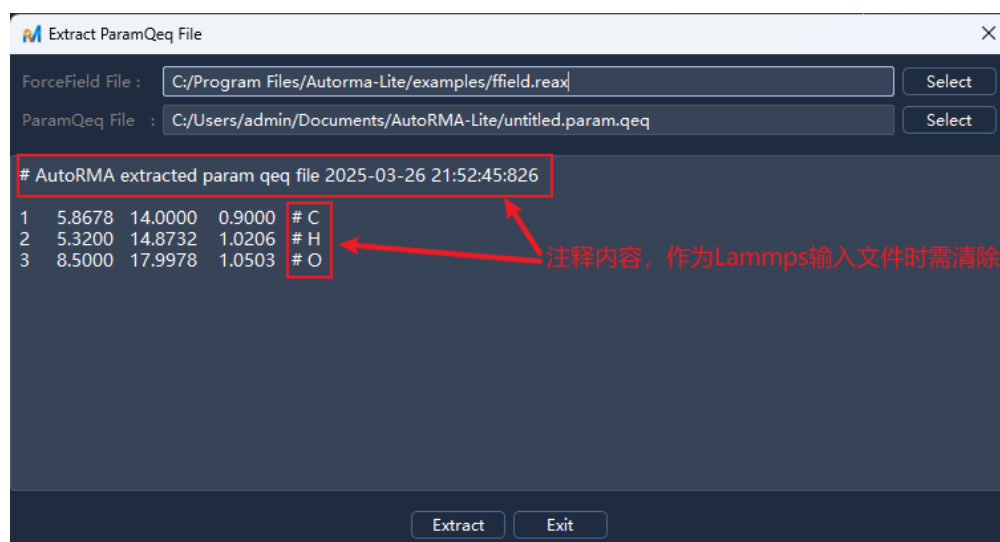


图 2: 图 4.1.2: ParamQEQ 内容结果展示

1. 点击菜单栏 *Tools->Generate Data File* 菜单或工具栏 *Generate ParamQeq File* 按钮打开操作面板, 填写 (选择)car/mdf 文件和生成文件路径, 设置相关参数后点击 *Generate* 按钮。

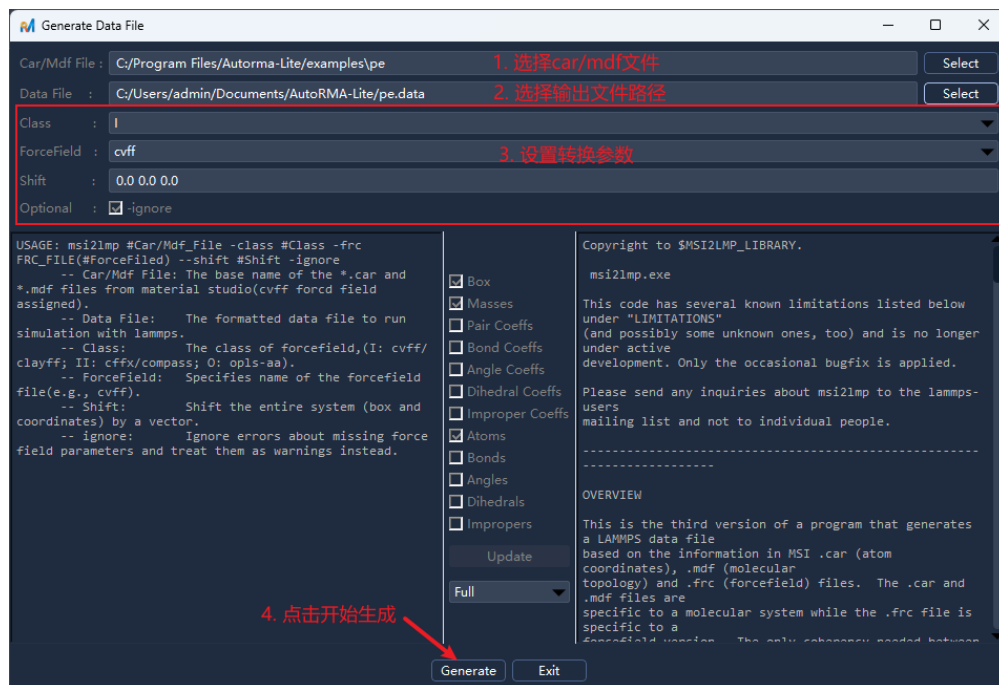


图 3: 图 4.2.1: 生成 Data 文件信息填写

2. 点击 *Generate* 之后会弹出原子信息确认面板, 如下图所示, 在此例中, 存在三种原子 H,C2,C3 三种原子, 但在 PE 热解中, 可将 C2/C3 同归为 C, 用同一个原子类型标识, 可简化模拟结果分析。如: 若区分为 C2 和 C3 则会出现 CCH4 的物种; 若将其归类, 则该物种表现为 C2H4。当然, 是否需要归类处理, 需要视具体情况而定。若需要进行归类处理, 则如图选中归类的原子后点击 *Merge* 按钮即可。确认原子信息后点击 *OK* 按钮。
3. 生成的 Data 文件结果如下图所示, 右侧为 msi2lmp 生成的原始结果, 左侧为本软件处理后的结果。左侧默认只包含部分数据, 若要添加内容, 在选中相关内容标签后点击 *Update* 按钮即可。需要注意的是, 若要改变原子类型, 如图中 *Full* 改成 *Charge* 或 *Atomic*, 需要修改后点击下方 *Generate* 按钮重新生成。

5.3 分析 species 文件

Lammps 可直接导出 ReaxFF 模拟产生的物种 (Species) 文件。相关信息可参考[分析文件简介](#)。

AutoRMA-Lite 的主要功能是提供物种文件的分析功能。以下简单操作演示以供快速上手。

1. 打开 AutoRMA 软件后选择 **Create a new Project**, 点击 **OK** 按钮后选择已有项目路径。当然也可以通过菜单栏 (*File->New*) 或工具栏 (*New*) 按钮开始新建项目。
2. 选择新建项目类型, 需要注意的是 *AutoRMA* 只能选择 **Species-Based, Bonds-Based* 只在 *AutoRMA-Full* 版本提供 ***。
3. 填写分子文件、项目路径和原子符号等信息。其中原子符号决定了输出分子式的格式, 比如填写 *C H*, 则分子 *C2H4* 显示为 *C2H4*; 若填写 *H C*, 则分子 *C2H4* 显示为 *H4C2*。可选设置默认即可, 具体介绍见后续章节详解。
4. 分析完成, 可以尽情享受啦。

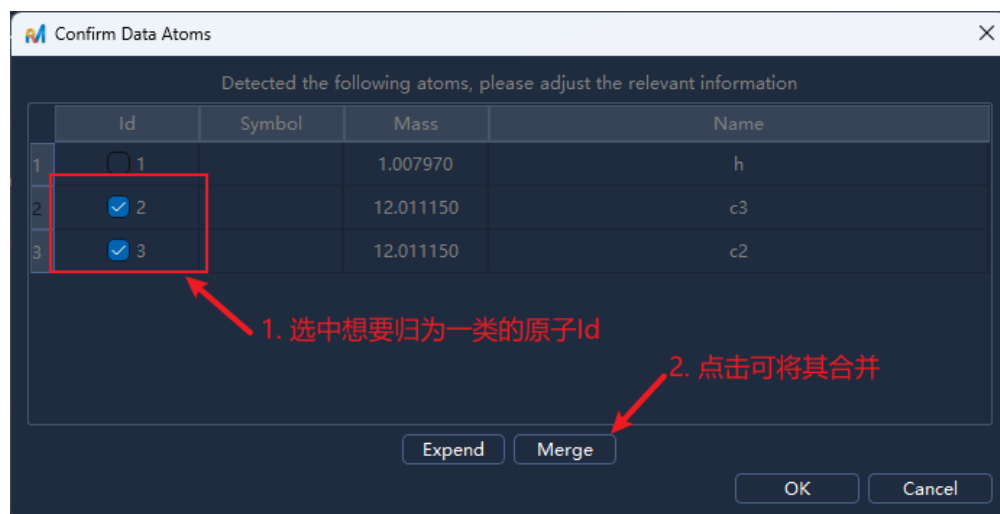


图 4: 图 4.2.2: 原子类型处理

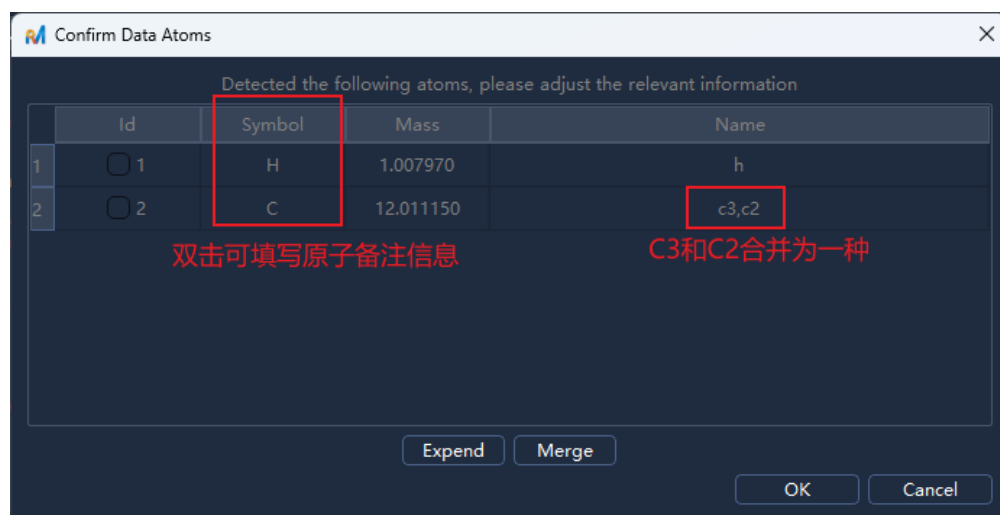


图 5: 图 4.2.3: 备注信息处理

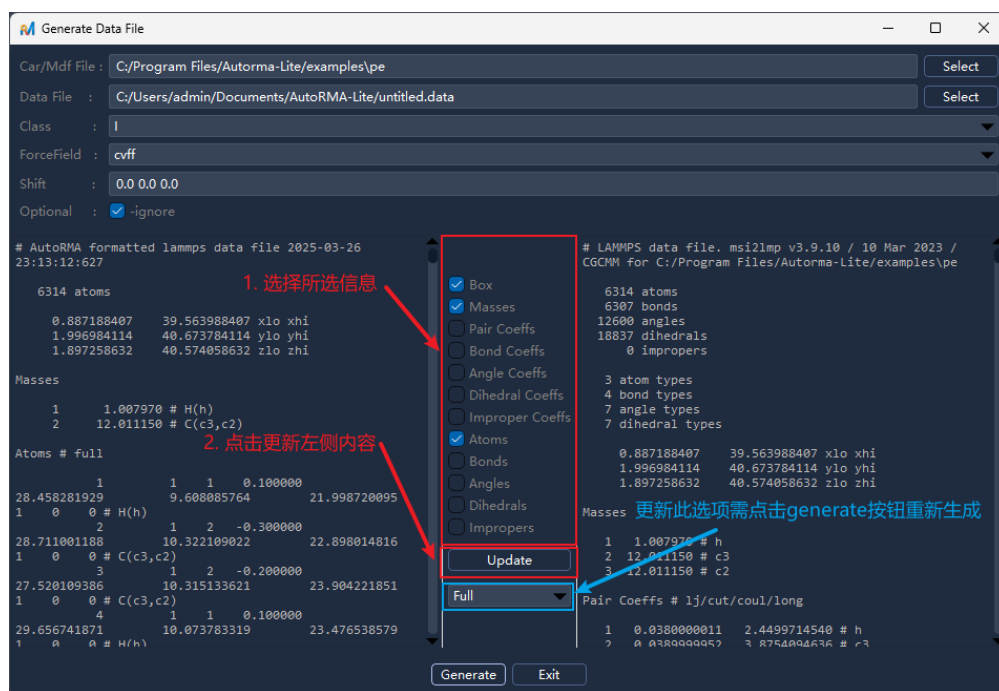


图 6: 图 4.2.4: DataFile 内容结果展示

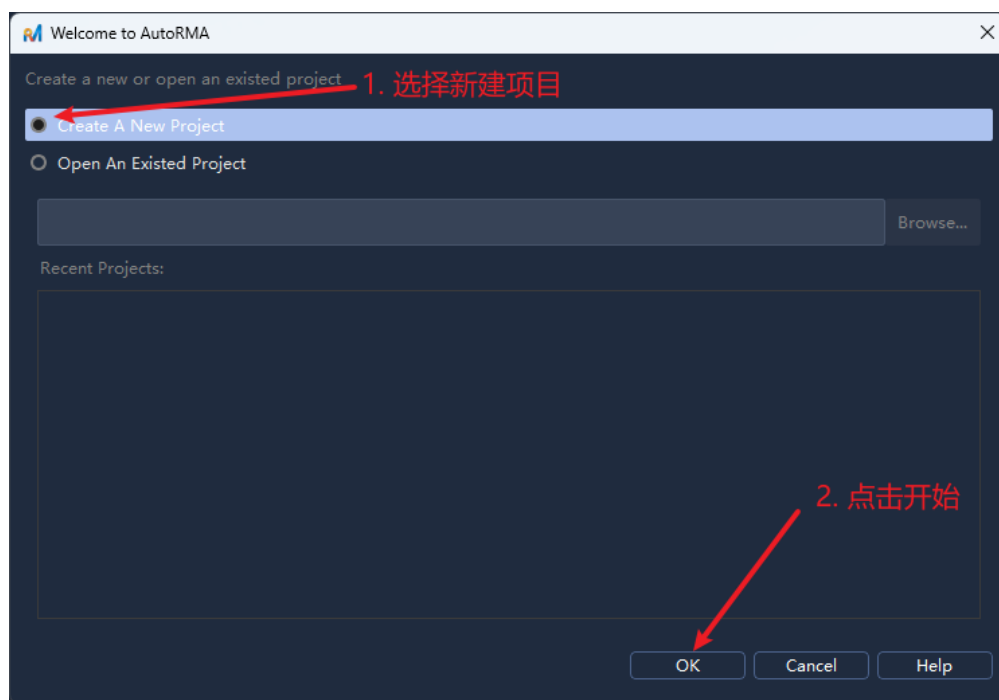


图 7: 图 4.3.1: 开始新建项目

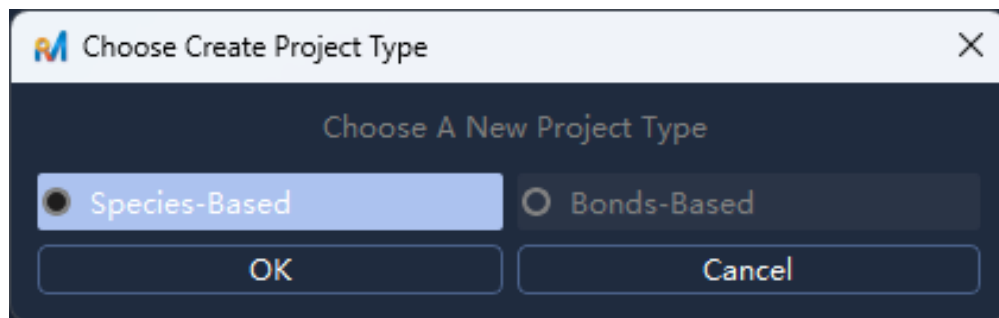


图 8: 图 4.3.2: 选择新建项目类型

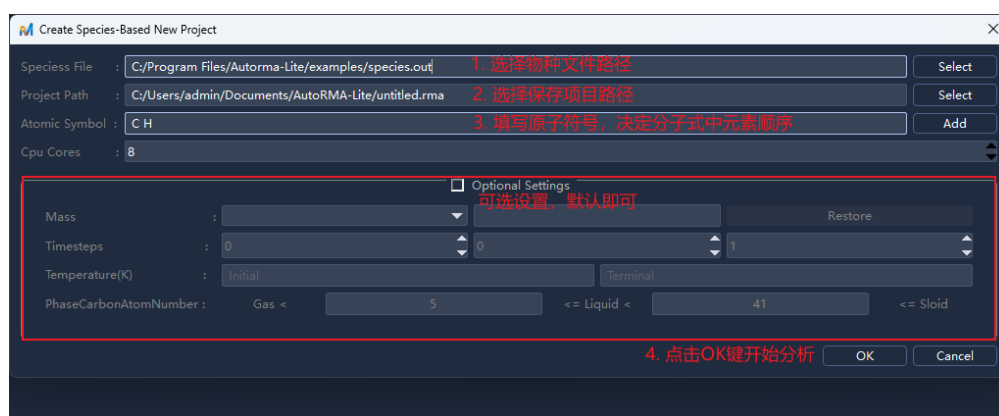


图 9: 图 4.3.3: 设置项目信息

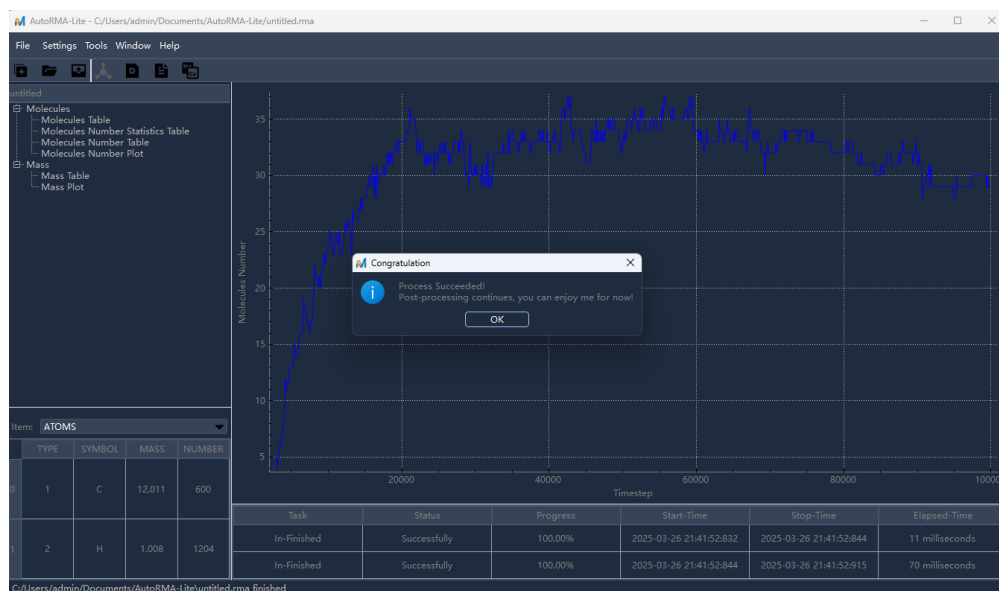


图 10: 图 4.3.4: 分析完成

5.4 打开已有项目

1. 在打开 AutoRMA 软件后选中 *Open An Existed Project*, 然后可以双击下方 *Recent Projects* 所列条目选择已有项目, 或点击 *Browse* 以通过文件对话框选择 新建项目产生的以 *.rma* 结尾的文件后点击 **OK** 以打开项目。当然也可以通过菜单栏 (*File->Open*) 或工具栏 (*Open*) 按钮打开已有项目。

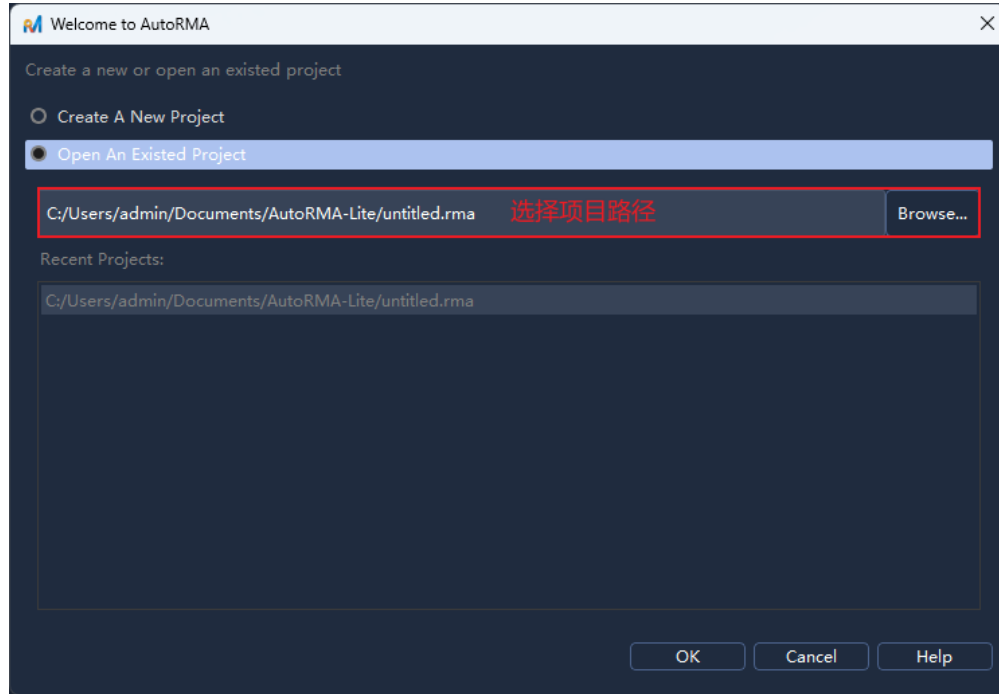


图 11: 图 5.3.1: 打开项目

2. 打开完成, 可以尽情享受啦。

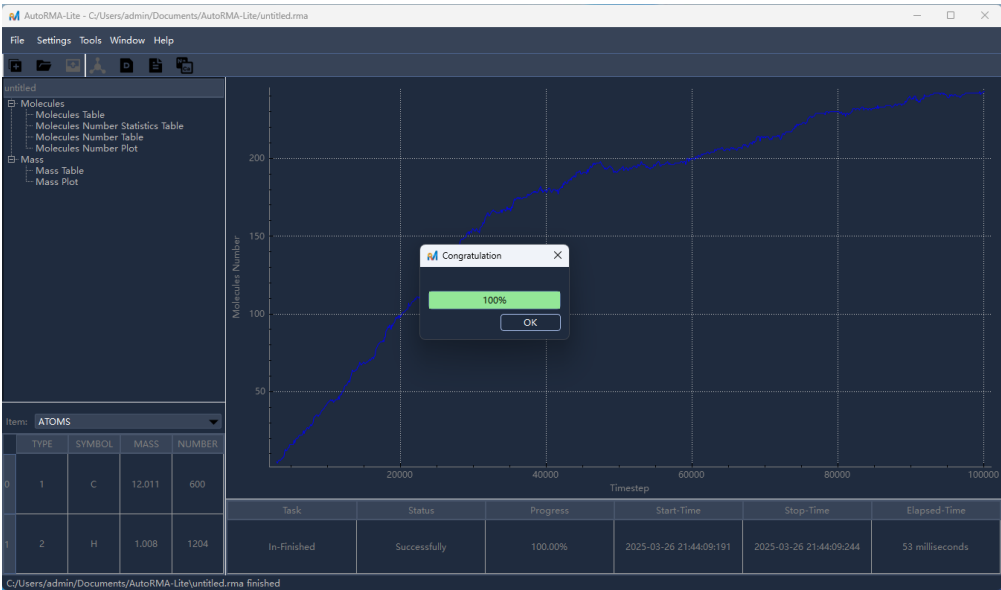


图 12: 图 5.3.2: 打开完成